

Ind. J. Chem. Res., 2015, 2, 205 - 212

**COMPUTATIONAL STUDY NATURAL COLOR ESSENCE (DYES) AS ACTIVE MATERIAL ON ORGANIC SOLAR CELL WITH DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT)****Studi Komputasi Zat Warna (*Dyes*) Alami sebagai Material Aktif pada Sel Surya Organik Menggunakan Teori Fungsional Kerapatan (*Density Functional Theory, Dft*)****Yusthinus T. Male<sup>1\*</sup>, I Wayan Sutapa<sup>1</sup>, Olivia Merion Ranglalin<sup>1</sup>**<sup>1</sup>*Chemistry Department, Faculty of Mathematics and Natural Sciences  
Pattimura University, Kampus Poka, Jl. Ir. M. Putuhena, Ambon 97134**\*Corresponding author, e-mail: yusmale@fmipa.unpatti.ac.id*

Received: October 2014 Published: January 2015

**ABSTRACT**

Computational calculation has been done for anthocyanin, tocoferol and they derivatives. The computational calculation was conduct to know the compound potential of anthocyanin, tocoferol and they derivatives as active material on organic solar cell. Computational calculation was done by used Gaussian 03 for windows with ab initio alternative electron structure theory namely Density Functional Theory (DFT) with B3LYP method at basis set 6-31G (d). Computational calculation obtains that the structure of anthocyanin, tocoferol and they derivatives were symmetrical. There were two compounds of anthocyanin (A1 and A5) and two compounds of tocoferol (T3 and T4) which more stable than the others compounds. The compounds had lowest energy gap were consist of A1= 0.12629 eV, A5= 0.12570 eV, T3= 0.19334 eV and T4= 0.19231 eV. The moment dipole from compound of anthocyanin, tocoferol and they derivatives had highest value, they were A1 and T1 while the total energy had lowest value they A2 and T1. The Substituent methoxy and hydroxy were added the density load of C atom was substituted so it would increase the activity of the phenyl ring on anthocyanin and they derivatives, while substituent methyl and hydroxy were added the density load of C atom was substituted so it was increase the activity of the phenyl ring on tocoferol and they derivatives. For compounds of anthocyanin main orbital populations showed that there were load transfer only from middle chain (ether) and compounds of tocoferol main orbital populations showed that there was load transfer only from phenyl ring. The method of density functional B3LYP/6-31G(d) would be applied to structure prediction and electronic characteristic of anthocyanin, tocoferol compounds and they derivatives before synthetic.

**Keywords:** *Energy gap, DFT, moment dipole, total energy, anthocyanin, tocoferol, charge density, orbital populations*

**PENDAHULUAN**

Indonesia sendiri merupakan negara yang dilewati oleh garis khatulistiwa dan menerima panas matahari yang lebih banyak daripada negara lain, sehingga mempunyai potensial yang sangat besar untuk mengembangkan pembangkit listrik tenaga surya. Pemanfaatan radiasi matahari sebagai energi surya menggunakan sel surya. Sel surya dalah suatu devais yang bisa mengkonversi energi matahari menjadi energi listrik dengan menggunakan efek fotofoltaik. Sel surya terbagi menjadi dua jenis yaitu sel surya

anorganik dan sel surya organik. Sel surya anorganik disebut juga dengan sel surya konvensional silikon.

Terdapat tiga tipe dari sel surya organik, yaitu sel surya nanokristalin TiO tersensitisasi *dye*, sel surya molekul organik dan sel surya polimer (Dewan, 2006). Penggunaan *dye*-sensitisasi pada sel fotovoltaiik disebut *Dye-Sensitized Solar Cell* (DSSC) (Halme, 2002). *Dye* (zat warna) adalah oligomer dan monomer yang menyerap pada panjang gelombang tampak dan memiliki gugus kromofor (Petritsch, 2000).

Ada dua jenis *dye* yaitu *dye* alami (*natural dye*) dan *dye* sintetik. *Dye* alami lebih menguntungkan dibandingkan *dye* sintetik karena ketersediaan yang melimpah, murah dan tidak beracun.

Telah dilakukan beberapa penelitian untuk memperoleh *dye* yang unggul sebagai zat aktif pada sel surya organik namun penelitian – penelitian tersebut hanya menggunakan ekstrak kasar dari *dye* tanpa melakukan penentuan struktur dan pemurnian senyawa. Salah satu penelitian untuk memperoleh *dye* unggul sebagai zat aktif pada sel surya organik dilakukan oleh Maddu, dkk (2007) mengenai penggunaan Ekstrak Antosianin kol merah sebagai fotosensitisasi pada Sel Surya TiO<sub>2</sub> Nanokristal Tersensitisasi *Dye* yang menghasilkan tegangan rangkaian buka 500 mV, arus rangkaian pendek 5,6  $\mu$ A dan 7,2  $\mu$ A. Maahury, (2012) telah melakukan penelitian tentang perhitungan komputasi potensi senyawa *Dye* Kurkumin dan senyawa analog kurkumin sebagai material aktif pada sel surya organik dengan Teori Fungsional Kerapatan (DFT) yang mendapati bahwa analog kurkumin 1,5-bis-(4-hidroksi-3,5-dimetoksifenil)-1,4-pentadien-3-on memiliki celah energi terkecil yaitu 0.126 eV dan dengan metode yang digunakan dapat meramalkan struktur dan sifat elektronik dari kurkumin dan turunannya sebelum disintesis.

Antosianin merupakan pigmen pembawa warna merah keunguan pada buah-buahan, sayuran, dan tanaman bunga. Antosianin merupakan senyawa flavonoid yang dapat melindungi sel dari ultraviolet. Antosianin diketahui dapat mengobati berbagai penyakit berbahaya, seperti kanker, diabetes, dan serangan jantung. Antosianin dari bunga Hibiscus sabdariffa (Malvaceae) telah digunakan secara efektif untuk melawan hipertensi dan gangguan hati. Selain itu, juga punya efek antiradang, antibakteri, dan mencegah penyakit diabetes melitus. Antosianin diyakini punya efek antioksidan sangat baik, karena dapat menghambat berbagai radikal bebas (Marta, 2009). Beberapa senyawa turunan antosianin yang aktif dan banyak ditemukan adalah sianidin, malvidin, delphinidin, pelargonidin, peonidin, dan petunidin.

Kimia komputasi dapat meramalkan potensi dan sifat bahan sebelum disintesis. Kimia komputasi menunjukkan bahwa suatu sistem

kimia dideskripsikan secara matematis menggunakan hukum-hukum fisika dan diselesaikan menggunakan komputer. Kimia komputasi juga bermanfaat untuk meramalkan struktur, mekanisme dan energetika reaksi yang terjadi di laboratorium sehingga kimiawan dapat mendesain struktur dan meramalkan sifat suatu senyawa sebelum melakukan sintesis (Male, 2009).

Dalam kimia komputasi terdapat dua prosedur pendekatan yaitu mekanika molekuler dan teori struktur elektron (Male, 2009). Mekanika molekuler merupakan sebuah metode empiris yang digunakan untuk menyatakan energi potensial dari molekul sebagai fungsi dari variable geometri. Mekanika molekul menggunakan pendekatan mekanika klasik. Metode mekanika molekul bermanfaat untuk pemodelan sistem makromolekul tetapi tidak dapat digunakan untuk mempelajari sistem yang melibatkan distribusi elektron seperti pembentukan atau pemutusan ikatan serta proses eksitasi elektron (Male, 2009), sedangkan untuk teori struktur elektron menggunakan pendekatan mekanika kuantum yang dibutuhkan untuk mempelajari partikel-partikel berukuran mikro seperti elektron, inti, atom dan molekul yang sifat dan kelakuannya tidak dapat dijelaskan dengan mekanika klasik. Dalam mekanika kuantum, sistem digambarkan sebagai fungsi gelombang yang dapat diperoleh dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger. Terdapat dua metode dalam kimia kuantum, yaitu semiempiris dan *ab initio* (Pranowo, 2001).

## METODOLOGI

### Perangkat Penelitian

Perangkat penelitian yang digunakan untuk melakukan studi komputasi, terdiri dari perangkat keras dan perangkat lunak.

### Perangkat keras

Penelitian ini menggunakan Perangkat keras berupa satu buah komputer dengan spesifikasi: Prosesor Intel Dual Core 2 GHz, Harddisk 180 GB, Random Access Memory (RAM) 1 GB, Double Data Random (DDR) 2.

## Perangkat Lunak

Semua perangkat lunak yang digunakan pada penelitian ini berbasis *windows* yaitu *windows Xp*. Input struktur awal dan posisi atom dari seluruh senyawa masing-masing digambarkan menggunakan *Hyperchem versi 8.0*. *GaussView 3.07* digunakan sebagai *viewer* input sebelum perhitungan menggunakan *GAUSSIAN 3.0 for Windows™*. *GAUSSIAN 3.0 for Windows™* digunakan untuk melakukan beberapa perhitungan yaitu optimasi geometri dan perhitungan frekuensi. *GaussSum 2.2* digunakan untuk melihat spektrum IR hasil perhitungan.

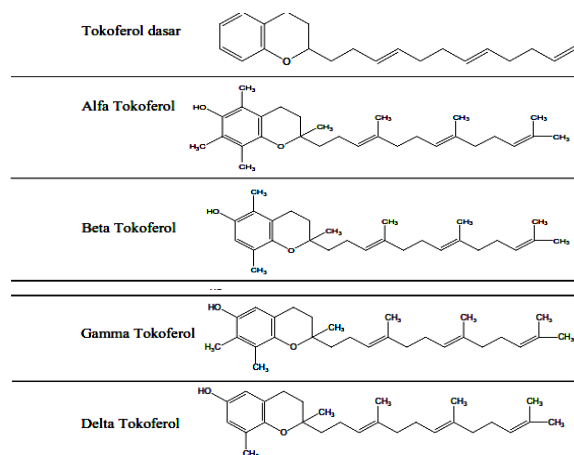
## Metode Komputasi

Perhitungan komputasi menggunakan Teori Struktur Elektron alternatif *ab initio* yaitu Teori Fungsional Kerapatan (*Density Functional Theory*, DFT) dengan metode fungsional gabungan parameter tiga Becke dan Lee-Yang-Parr (B3LYP). Semua perhitungan menggunakan himpunan basis 6-31G(d).

## Materi Penelitian

Tabel 1. Input Struktur Molekul Senyawa *Dyes* Alami beserta turunannya

Nama Senyawa	Struktur
Antosianin dasar	
Cyanidin	
Malvidin	
Delphinidin	
Pelargonidin	
Peonidin	
Petunidin	



## Prosedur Penelitian

Untuk melakukan penelitian ini dibutuhkan struktur tiga dimensi dari *dyes* alami (antosianin dan tokoferol beserta turunannya) yang tepat dan benar. Informasi struktur dari literatur dan situs-situs *internet* tentang struktur antosianin dan tokoferol beserta turunannya kemudian digunakan sebagai acuan untuk membentuk model awal dari senyawa-senyawa tersebut.

Koordinat struktur awal dibuat dengan menggambarkan pada *Hyperchem versi 8.0* kemudian struktur dua dimensi menjadi tiga dimensi menggunakan salah satu perintah yaitu "Add H and model build". Struktur *dyes* tersebut disimpan dalam bentuk *file.hin*. Langkah selanjutnya yaitu struktur *dyes* tersebut kemudian dikonversikan dari *file.hin* ke *file.mol*. Struktur yang telah dikonversikan kemudian diperbaiki strukturnya pada *GaussView 03* dan disimpan koordinat kartesiannya ditempat terpisah. Struktur tersebut disimpan di *file.gif* dan kemudian dijadikan bahan masukan (*input*) pada *Gaussian 03 for Windows™* dengan menentukan perhitungan yang akan digunakan yaitu metode Teori Fungsional Kerapatan (*Density Functional Theory*, DFT) dengan fungsional gabungan parameter tiga Becke dan Lee-Yang-Parr (B3LYP). Semua perhitungan menggunakan *Basis set 3-21G\** dan 6-31G(d) dan memasukan multiplisitas. Input disimpan dalam format *file.chk*.

## Optimasi Geometri

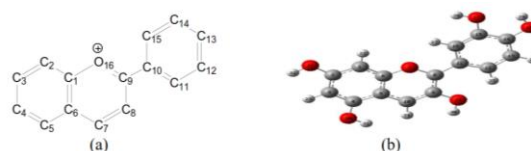
Pada penelitian ini digunakan metode mekanika kuantum Teori Fungsional Kerapatan (*Density Functional Theory*, DFT) dengan

fungsional gabungan parameter tiga Becke dan Lee-Parr (B3LYP). Semua perhitungan menggunakan *Basis set* 3-21G\* dan 6-31G(d). Optimasi geometri dilakukan untuk semua senyawa sebagai materi dalam penelitian ini. Optimasi geometri dilakukan dengan bahan yang telah dipersiapkan sebelumnya pada *GaussView 03* dan dijalankan. Setiap struktur disimpan sebelum optimasi maupun setelah optimasi. Optimasi geometri dilakukan hingga diperoleh struktur dengan energi paling rendah. Kondisi ini ditandai dengan tidak ditemukannya frekuensi bernilai imajiner pada hasil perhitungan. Setelah perhitungan selesai dilakukan maka akan diperoleh *output* yang berisi beberapa informasi yaitu geometri dan sifat elektronik seperti muatan atom, momen dipol, energi, energi HOMO-LUMO dan energi komponen orbital molekul terdepan untuk masing-masing senyawa. Untuk energi HOMO-LUMO dapat digunakan untuk menghitung selisih energi HOMO-LUMO yang disebut juga celah energi atau *band gap* untuk setiap senyawa tersebut. Untuk energi komponen orbital molekul terdepan dapat digunakan untuk menghitung populasi orbital untuk setiap senyawa.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

### Optimasi Geometri Antosianin dan Turunannya

Optimasi geometri dilakukan terhadap sudut ikatan dan sudut dihedral serta panjang ikatan (Å). Sudut ikatan adalah sudut antara sepasang atom yang saling terikat dengan atom lain. Sudut dihedral adalah sudut antara suatu atom dengan bidang yang dibentuk oleh tiga atom, sedangkan panjang ikatan adalah jarak antara dua inti atom yang saling terikat. (Male, 2009). Antosianin memiliki struktur dasar yang samayaitu dibangun oleh dua cincin fenil yang dijembatani oleh rantai tengah eter. Struktur antosianin dasar beserta penomoran atom dari program *chem draw* dan penomoran atom dari program *Gaussian 03* sebagai patokan untuk membandingkan nilai parameter struktur dasar dengan molekul tersubstitusi disajikan pada Gambar 1.



Gambar 1. (a) Struktur Antosianin dasar beserta penomoran atom berdasarkan Chem Draw dan (b) Contoh salah satu struktur 3D turunan antosianin teroptimasi serta penomorannya.

Antosianin dan turunannya dioptimasi menggunakan metode Teori Fungsional Kerapatan menghasilkan informasi struktur stabil (dengan energi teroptimasi) dengan parameter geometri berupa panjang ikatan (Å), sudut ikatan ( $^{\circ}$ ) dan sudut dihedral ( $^{\circ}$ ) ikatan dan sudut dihedral untuk cincin fenil I dan II antosianin dasar dan turunannya memiliki nilai yang hampir sama. Adanya substitusi gugus metoksi dan hidroksi pada cincin fenil memperpanjang panjang ikatan  $r_{10,11}$  terhadap molekul A1 dan A4, panjang ikatan  $r_{10,11}$  terhadap molekul A2 dan A6, panjang ikatan  $r_{12,13}$  terhadap molekul A6 dan panjang ikatan  $r_{13,14}$  terhadap molekul A1, A2, A5 dan A4 dengan nilai sebesar 0,01 , memperkecil sudut ikatan  $< 12, 13, 14$  tetapi tidak mempengaruhi sudut dihedral. Untuk rantai tengah eter, substitusi gugus-gugus tersebut tidak mempengaruhi panjang ikatan, sudut ikatan maupun sudut dihedralnya.

### Sifat Elektronik Antosianin dan Turunannya

Sifat elektronik antara lain muatan atom, momen dipol, energi dan celah energi. Sifat elektronik antosianin dan turunannya untuk muatan atom ditampilkan dalam Tabel 2. Berdasarkan data tersebut, dapat diketahui bahwa muatan atom C berubah seiring dengan tersubstitusinya gugus. Untuk gugus hidroksi dan metoksi yang tersubstitusi menyebabkan muatan atom C berubah menjadi positif. Untuk gugus hidroksi dan metoksi, atom C pada cincin fenil mengikat atom O. Untuk atom-atom C yang mengikat atom O dari gugus hidroksi dan metoksi cenderung bermuatan lebih positif, karena efek induksi muatan parsial negatif dari atom O yang diikatnya menyebabkan atom C mengalami interaksi elektrostatik menjadi lebih positif (Pustipitasari, 2005).

Tabel 2. Muatan atom antosianin dan turunannya.

Senyawa Posisi atom	Muatan Atom						
	A0	A1	A2	A3	A4	A5	A6
C1	0.313	0.318	0.317	0.318	0.316	0.317	0.318
C2	-0.184	-0.237	-0.237	-0.237	-0.237	-0.237	-0.237
C3	-0.139	<b>0.367</b>	<b>0.367</b>	<b>0.367</b>	<b>0.367</b>	<b>0.366</b>	<b>0.367</b>
C4	-0.127	-0.243	-0.243	-0.243	-0.243	-0.243	-0.243
C5	-0.212	<b>0.240</b>	<b>0.239</b>	<b>0.240</b>	<b>0.240</b>	<b>0.239</b>	<b>0.240</b>
C6	0.155	0.125	0.126	0.125	0.126	0.126	0.125
C7	-0.184	-0.279	-0.280	-0.279	-0.279	-0.280	-0.279
C8	-0.172	<b>0.325</b>	<b>0.328</b>	<b>0.328</b>	<b>0.325</b>	<b>0.325</b>	<b>0.328</b>
C9	0.289	0.251	0.248	0.247	0.251	0.252	0.246
C10	0.082	0.081	0.092	0.083	0.083	0.080	0.093
C11	-0.178	-0.195	-0.275	-0.252	-0.189	-0.196	-0.275
C12	-0.137	-0.181	<b>0.358</b>	<b>0.332</b>	-0.169	-0.179	<b>0.356</b>
C13	-0.128	<b>0.326</b>	<b>0.240</b>	<b>0.249</b>	<b>0.353</b>	<b>0.308</b>	<b>0.260</b>
C14	-0.130	<b>0.316</b>	<b>0.362</b>	<b>0.329</b>	-0.196	<b>0.353</b>	<b>0.324</b>
C15	-0.172	-0.253	-0.266	-0.259	-0.176	-0.261	-0.258
O	-0.558	-0.576	-0.576	-0.575	-0.573	-0.577	-0.575
OH (C3)	-	-0.647	-0.647	-0.647	-0.647	-0.647	-0.647
OH (C5)	-	-0.648	-0.648	-0.646	-0.648	-0.648	-0.648
OH (C8)	-	-0.651	-0.652	-0.648	-0.655	-0.653	-0.651
OH (C12)	-	-0.657	-	-0.657	-	-	-
OH (C13)	-	-0.678	-0.671	-0.684	-0.642	-0.652	-0.669
OH (C14)	-	-	-	-0.688	-	-	-0.693
OCH <sub>3</sub> (C12)	-	-	-0.529	-	-	-	-0.527
OCH <sub>3</sub> (C14)	-	-	-0.652	-	-	-	-

Tabel 3. Momen dipol antosianin dan turunannya

Senyawa	Momen Dipol
A0	7.41
A1	<b>31.69</b>
A2	16.27
A3	22.59
A4	20.85
A5	27.68
A6	19.36

Dari Tabel 3, menunjukkan bahwa adanya variasi nilai momen dipol untuk masing-masing senyawa karena substituen yang tersubstitusi berbeda. Momen dipol merupakan suatu ukuran yang dipakai untuk mengukur seberapa polarnya suatu molekul. Polaritas ditentukan oleh elektronegativitas atom-atom yang terlibat. Dengan adanya atom oksigen pada gugus substituen, yakni gugus hidroksi dan metoksi menjadikan senyawa A1 memiliki nilai momen dipol yang lebih besar dari yang lainnya. Hal ini disebabkan karena atom oksigen yang dimiliki gugus substituen memiliki kemampuan untuk menarik elektron (elektronegativitas) yang lebih besar dibandingkan atom karbon. Dengan demikian, akan terbentuk ikatan yang terpolarisasikan ketika atom oksigen berikatan dengan atom karbon. Nilai polaritas keseluruhan diperoleh dari polaritas ikatan dan pengaruh

elektron bebas dalam molekul. Atom oksigen memiliki pasangan elektron bebas yang dapat memperbesar momen dipol.

Tabel 4. Energi total antosianin dan turunannya

Senyawa	Energi (KJ/mol)
A0	-1.7167
A1	-2.7047
A2	<b>-3.1089</b>
A3	-2.9024
A4	-2.5071
A5	-2.8080
A6	-3.0056

Berdasarkan Tabel 4, energi total teroptimasi dengan perhitungan pada metode DFT memiliki energi terendah pada senyawa A2 yaitu sebesar -3.1089 KJ/mol. Hal ini disebabkan karena senyawa A2 memiliki gugus hidroksi dan metoksi yang lebih banyak dibanding dengan senyawa turunan yang lain sehingga energi yang dibutuhkan untuk mengoptimasi senyawa ini lebih kecil dibanding senyawa turunan lainnya.

Tabel 5. Selisih energi (HOMO-LUMO) antosianin dan turunannya

Energi	Senyawa						
	A0	A1	A2	A3	A4	A5	A6
E <sub>LUMO</sub> (eV)	-0.03124	-0.01214	-0.00942	-0.01185	-0.01122	-0.01086	-0.01051
E <sub>HOMO</sub> (eV)	-0.14358	-0.13843	-0.13587	-0.13913	-0.13782	-0.13656	-0.13765
ΔE (eV)	0.11234	0.12629	0.12645	0.12728	0.12660	<b>0.12570</b>	0.12714

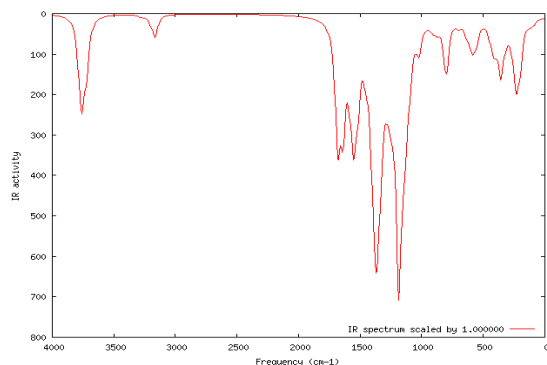
Nilai celah energi untuk masing-masing senyawa berbeda sesuai dengan data pada Tabel 5. Bintarti (2008) mengatakan selisih energi HOMO-LUMO yang lebih rendah akan mencerminkan kemudahan dalam proses terjadinya eksitasi elektron sehingga sifat kepekaanya terhadap cahaya (fotosensitivitas) akan cenderung lebih kuat. Dari Tabel 9, dapat dilihat bahwa senyawa A5 memiliki selisih energi HOMO-LUMO yang terkecil yaitu sebesar 0.12570 eV. Ini menunjukkan bahwa senyawa A5 sangat berpotensi sebagai *Sun Protection Factor* (SPF). Hal ini dapat disebabkan karena adanya substituen. Substituen yang cenderung sebagai penarik atau pun sebagai



pendorong elektron akan menyebabkan perubahan terhadap energi HOMO-LUMO.

### Frekuensi Infra Merah (IR) Struktur Antosianin dan Turunannya.

Hasil perhitungan frekuensi dianalisis untuk mengetahui pergeseran bilangan gelombang akibat adanya substitusi gugus-gugus yang terjadi pada struktur xanton. Untuk melihat hubungan serapan *IR* dengan intensitasnya maka dilakukan perhitungan frekuensi vibrasi. Untuk setiap tipe ikatan yang berbeda akan memiliki sifat frekuensi yang berbeda pula, sehingga dapat dipakai untuk menentukan jenis ikatan, struktur maupun gugus fungsi. Analisis infra merah untuk keseluruhan struktur antosianin menunjukkan adanya serapan kuat C-O (eter) pada  $1286,75\text{ cm}^{-1}$  kecuali untuk senyawa A1 dan A4. Untuk senyawa A1 dan A4, serapan kuat C-O (alkohol) pada  $1180,72\text{ cm}^{-1}$ . Spektra infra merah dari senyawa A1 akan ditampilkan pada Gambar 2.

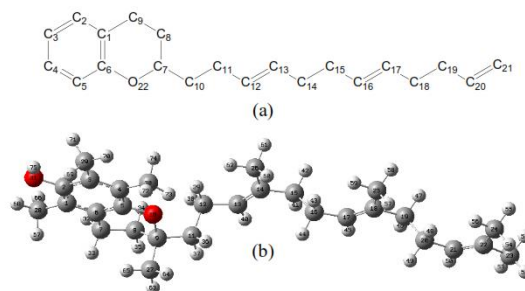


Gambar 2. Spektra Infra Merah Senyawa A1

### Optimasi Geometri Tokoferol dan Turunannya

Optimasi geometri dilakukan terhadap sudut ikatan dan sudut dihedral serta panjang ikatan. Sudut ikatan adalah sudut antara sepasang atom yang saling terikat dengan atom lain. Sudut dihedral adalah sudut antara suatu atom dengan bidang yang dibentuk oleh tiga atom sedangkan panjang ikatan adalah jarak antara dua inti atom yang saling terikat (Male, 2009).

Struktur tokoferol dasar beserta penomoran atom dari program *chem draw* dan penomoran atom dari program *Gaussian 03* sebagai patokan untuk membandingkan nilai parameter struktur dasar dengan molekul tersubstitusi disajikan pada Gambar 3.



Gambar 3. (a) Struktur Tokoferol dasar beserta penomoran atom berdasarkan Chem Draw dan (b) Contoh salah satu struktur 3D turunan tokoferol teroptimasi serta penomorannya

### Sifat Elektronik Tokoferol dan Turunannya

Sifat elektronik antara lain muatan atom, momen dipol, energi dan celah energi. Sifat elektronik tokoferol dan turunannya untuk muatan atom ditampilkan dalam Tabel 6.

Tabel 6. Muatan atom tokoferol dan turunannya

Senyawa	Muatan atom				
	T0	T1	T2	T3	T4
Posisi atom					
C1	0.123	0.088	0.074	0.062	0.131
C2	-0.198	<b>0.082</b>	<b>0.075</b>	-0.241	-0.239
C3	-0.133	<b>0.142</b>	<b>0.304</b>	<b>0.199</b>	<b>0.352</b>
C4	-0.135	<b>0.114</b>	-0.268	<b>0.182</b>	-0.199
C5	-0.185	<b>0.057</b>	<b>0.120</b>	<b>0.179</b>	-0.195
C6	0.332	0.209	0.269	0.348	0.332
C7	0.145	<b>0.237</b>	<b>0.314</b>	<b>0.313</b>	<b>0.310</b>
C8	-0.295	-0.258	-0.290	-0.290	-0.292
C9	-0.346	-0.331	-0.360	-0.360	-0.357
C10	-0.279	-0.226	-0.271	-0.270	-0.269
C11	-0.312	-0.305	-0.318	-0.317	-0.318
C12	-0.097	-0.146	-0.172	-0.173	-0.173
C13	-0.095	<b>0.155</b>	<b>0.193</b>	<b>0.192</b>	<b>0.194</b>
C14	-0.301	-0.308	-0.326	-0.326	-0.326
C15	-0.301	-0.291	-0.302	-0.301	-0.302
C16	-0.094	-0.138	-0.170	-0.167	-0.168
C17	-0.094	<b>0.152</b>	<b>0.193</b>	<b>0.191</b>	<b>0.191</b>
C18	-0.303	-0.308	-0.325	-0.326	-0.326
C19	-0.300	-0.292	-0.302	-0.302	-0.302
C20	-0.041	-0.129	-0.161	-0.160	-0.160
C21	-0.341	<b>0.145</b>	<b>0.189</b>	<b>0.188</b>	<b>0.188</b>
O22	-0.548	-0.597	-0.576	-0.578	-0.572
$\underline{\text{O}}\text{H (C3)}$	-	-0.637	-0.663	-0.663	-0.653
$\underline{\text{CH}}_3\text{ (C2)}$	-	-0.478	-0.536	-	-
$\underline{\text{CH}}_3\text{ (C4)}$	-	-0.529	-	-0.583	-
$\underline{\text{CH}}_3\text{ (C5)}$	-	-0.487	-0.514	-0.487	-0.514

Dari Tabel 6, memperlihatkan bahwa nilai muatan atom untuk struktur tokoferol dan turunannya memiliki nilai yang berbeda sehingga sifat elektronik struktur tersebut tidak identik. Ini disebabkan karena adanya penambahan substituen pada cincin fenil, sehingga terjadi perbedaan sifat elektronik masing-masing senyawa.

Tabel 7. Momen dipol tokoferol dan turunannya

Senyawa	Momen Dipol
T0	14.29
T1	<b>11.78</b>
T2	8.66
T3	7.79
T4	8.89

Dari Tabel 7, memperlihatkan bahwa nilai momen dipol menunjukkan angka tertinggi terdapat pada senyawa T1. Ini menunjukkan nilai kepolaran semakin tinggi jika dibandingkan dengan tiga senyawa lainnya.

Tabel 8. Energi total tokoferol dan turunannya

Senyawa	Energi (KJ/mol)
T0	-2.3442
T1	<b>-3.3674</b>
T2	-3.2649
T3	-3.2649
T4	-3.0583

Dari Tabel 8, menunjukkan nilai energi total terkecil terdapat pada senyawa T1 yaitu -3.3674 KJ/mol. Hal ini disebabkan karena senyawa T1 memiliki gugus metil yang lebih banyak dibanding dengan senyawa yang lain sehingga energi yang dibutuhkan untuk mengoptimasi senyawa ini lebih kecil dibanding senyawa lainnya. Ini menunjukkan bahwa senyawa yang paling stabil adalah senyawa T1 jika dibandingkan dengan tiga senyawa lainnya.

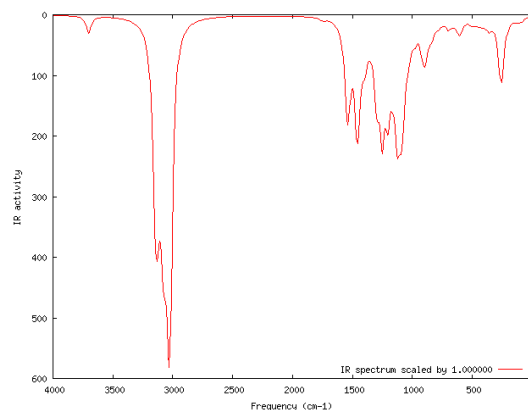
Tabel 9. Selisih energi (HOMO-LUMO) tokoferol dan turunannya

Energi	Senyawa				
	T <sub>0</sub>	T <sub>1</sub>	T <sub>2</sub>	T <sub>3</sub>	T <sub>4</sub>
E <sub>LUMO</sub> (eV)	0.00419	0.00931	0.00886	0.00819	0.00145
E <sub>HOMO</sub> (eV)	-0.20920	-0.18687	-0.18499	-0.18515	-0.19086
ΔE (eV)	0.21339	0.19618	0.19385	0.19334	<b>0.19231</b>

Dari Tabel 9, menunjukkan bahwa celah energi terkecil terdapat pada senyawa T4 yaitu sebesar 0.19231 eV jika dibandingkan dengan tiga senyawa lainnya. Ini menunjukkan bahwa senyawa T4 sangat berpotensi sebagai *SPF*.

### Frekuensi Infra Merah (IR) Struktur Tokoferol dan Turunannya

Hasil perhitungan frekuensi dianalisis untuk mengetahui pergeseran bilangan gelombang akibat substitusi gugus-gugus pada struktur tokoferol dasar dan turunannya. Analisis infra merah untuk keseluruhan struktur tokoferol menunjukkan adanya serapan kuat C-H (aromatik) pada 3034,94 cm<sup>-1</sup> kecuali untuk senyawa T0. Untuk senyawa T0, serapan kuat CH<sub>2</sub> pada 1285,9 cm<sup>-1</sup>. Spektra infra merah dari senyawa T1 akan ditampilkan pada Gambar 4.



Gambar 4. Spektra infra merah senyawa T1

### KESIMPULAN

Hasil perhitungan komputasi terhadap senyawa *dyes* alami menunjukkan bahwa:

1. *Dyes* alami yang dihasilkan sebagai material aktif sel surya organik terbaik yaitu senyawa peonidin (A5) dari antosianin dan senyawa delta-tokoferol (T4) dari tokoferol, karena memiliki celah energi terkecil yaitu 0.12570 dan 0.19231 eV.

2. Metode teori fungsional kerapatan B3LYP/6-31G(d) dapat diaplikasikan untuk meramalkan struktur dan sifat elektronik dari antosianin, tokoferol dan turunannya sebelum disintesis.

#### DAFTAR PUSTAKA

- Dewan, R. 2006. *Organic Solar Cell*. Organic Electronics Course Presentation: International University Bremen.
- Halme, J., 2002. *Dye sensitized Nanostructured and Organic Photovoltaic Cells : technical review and preeliminary test*. Master Thesis of Helsinki University of Technology.
- Maahury, M. F., 2012. *Perhitungan Komputasi Potensi Senyawa Dye Kurkumin dan Senyawa Analog Kurkumin Sebagai Material Aktif pada Sel Surya Organik dengan Teori Fungsional Kerapatan (DFT)*. Skripsi Universitas Pattimura : Ambon.
- Maddu, A., Zuhri, M. dan Irmansyah, 2007. *Penggunaan ekstrak antosianin kol merah sebagai fotosensitizer pada sel surya TiO nanokristal tersensitisasi dye*. Makara Teknologi, Vol. 11 No. 2.
- Male, Y. T., 2009. *Studi Komputasi Senyawa Kompleks Transisi Spin Besi (II)*. Disertasi Institut Teknologi Bandung : Bandung.
- Marta, 2009. *Pewarna Makanan Antosianin*, (online), <http://marta1229.wordpress.com/2009/06/01/pewarna-makanan-antosianin/>, diakses tanggal 23 Mei 2012.
- Petritsch, K., 2000. *Organic Solar Cell Architectures*. Cambridge and Graz University : Austria.
- Pranowo, H. D., 2008. *Molecular Modeling and Simulation*. Chemistry Department, Gajah Mada University : Yogyakarta.